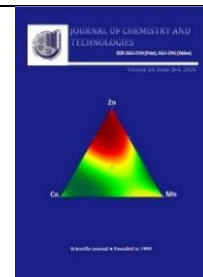




## Journal of Chemistry and Technologies

pISSN 2663-2934 (Print), ISSN 2663-2942 (Online)

journal homepage: <http://chemistry.dnu.dp.ua>



UDC 678:543.42+544.183.25

### THE QUANTUM-CHEMICAL INVESTIGATION OF INTERMOLECULAR INTERACTIONS IN COMPLEX SYSTEMS «POLYAMIDE-SILICA GEL»

Andrey V. Tokar\*,<sup>1</sup> Oleh S. Kabat<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Dnipro State Agrarian and Economic University, S. Yefremova St., 25, Dnipro, 49600, Ukraine

<sup>2</sup>Ukrainian State University of Chemical Technology, Gagarina Avenue, 8, Dnipro, 49005, Ukraine

Received 11 August 2020; accepted 12 October 2020; available online 4 November 2020

#### Abstract

The paper presents the results of quantum-chemical studies of polymer composite materials based on aromatic polyamide phenylon C1 filled with silica gel. Structural models of initial compounds with indication of charges on atoms and interatomic distances are offered. The theoretical models of complexes in «polyamide-silica gel» systems have been constructed, which describe the most probable intermolecular interactions of the polymer matrix with the filler. The adequacy of the obtained models was confirmed by the results of IR spectroscopy. It has been found that the chemical interaction of polymer molecules with the filler is carried out mainly due to the formation of strong hydrogen bonds that occur between oxygen atoms of carbonyl groups in polymer molecules and active hydroxyl groups on the surface of silica gel particles. The chemical nature for intermolecular interactions of polymer with filler has also been confirmed with preliminary physico-mechanical and thermophysical studies of polymer composite materials, as a result of which it was found, that the introduction of fine silica gel particles into the structure of phenylon C1 contributes to a significant increase of the level of stress at the yield strength, modulus of elasticity in compression and hardness with a shift of the corresponding values of heat and heat resistance of the obtained polymer composites in the area of higher temperatures.

*Keywords:* *ab initio* calculations; intermolecular interaction; hydrogen bond; stabilization energy; vibrational spectra.

### КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ МІЖМОЛЕКУЛЯРНИХ ВЗАЄМОДІЙ У КОМПЛЕКСНИХ СИСТЕМАХ «ПОЛІАМІД-СИЛІКАГЕЛЬ»

Андрій В. Токар,<sup>1</sup> Олег С. Кабат<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Дніпровський державний аграрно-економічний університет, вул. С. Єфремова, 25, Дніпро, 49600, Україна

<sup>2</sup>Український державний хіміко-технологічний університет, просп. Гагаріна, 8, Дніпро, 49005, Україна

#### Анотація

У роботі наведено результати квантово-хімічних досліджень полімерних композиційних матеріалів на основі ароматичного поліаміду фенілон С1, наповненого силікагелем. Запропоновано структурні моделі вихідних сполук із зазначенням зарядів на атомах та міжатомних відстаней. Побудовано теоретичні моделі комплексів у системі «поліамід-силікагель», що описують найбільш імовірні міжмолекулярні взаємодії полімерної матриці з наповнювачем. Адекватність отриманих моделей підтверджено результатами ІЧ-спектроскопії. Встановлено, що хімічна взаємодія молекул полімеру із наповнювачем здійснюється переважно за рахунок утворення міцних водневих зв'язків, які виникають між атомами Оксигену карбонільних груп у молекулах полімеру та активними гідроксильними групами на поверхні часток силікагелю. Хімічна природа міжмолекулярних взаємодій полімеру із наповнювачем також знаходить підтвердження за результатами проведених раніше фізико-механічних та теплофізичних досліджень полімерних композиційних матеріалів, які показали, що введення дрібнодисперсних часток силікагелю у структуру фенілону С1 сприяє значному підвищенню таких показників як рівень напруження при межі текучості, модуля пружності при стисканні та твердості зі змищенням відповідних значень тепло- та термостійкості одержаних полімерних композитів в область більш високих температур.

*Ключові слова:* *ab initio* розрахунки; міжмолекулярна взаємодія; водневий зв'язок; енергія стабілізації; коливальні спектри.

\*Corresponding author: tel.: +380677243352; e-mail: atokar\_2004@ukr.net

© 2020 Oles Honchar Dnipro National University

doi: 10.15421/082021

## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В КОМПЛЕКСНЫХ СИСТЕМАХ «ПОЛИАМИД-СИЛИКАГЕЛЬ»

Андрей В. Токарь,<sup>1</sup> Олег С. Кабат<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Днепровский государственный аграрно-экономический университет, ул. С. Ефремова, 25, Днепр, 49600, Украина

<sup>2</sup>Украинский государственный химико-технологический университет, пр. Гагарина, 8, Днепр, 49005, Украина

### Аннотация

В работе приведены результаты квантово-химических исследований полимерных композиционных материалов на основе ароматического полиамида фенилон С1, наполненного силикагелем. Предложены структурные модели исходных соединений с указанием зарядов на атомах и межмолекулярных расстояний. Построены теоретические модели комплексов в системе «полиамид-силикагель», описывающие наиболее вероятные межмолекулярные взаимодействия полимерной матрицы с наполнителем. Адекватность полученных моделей подтверждена результатами ИК-спектроскопии. Установлено, что химическое взаимодействие молекул полимера с наполнителем осуществляется преимущественно за счет образования прочных водородных связей, возникающих между атомами кислорода карбонильных групп в молекулах полимера и активными гидроксильными группами на поверхности частиц силикагеля. Химическая природа межмолекулярных взаимодействий полимера с наполнителем также находит подтверждение по результатам проведенных ранее физико-механических и теплофизических исследований полимерных композиционных материалов, которые показали, что введение мелкодисперсных частиц силикагеля в структуру фенилона С1 способствует значительному повышению таких показателей как уровень напряжения при пределе текучести, модуля упругости при сжатии и твердости со смещением соответствующих значений тепло- и термостойкости полученных полимерных композитов в область более высоких температур.

*Ключевые слова:* *ab initio* расчеты; межмолекулярное взаимодействие; водородная связь; энергия стабилизации; колебательные спектры.

### Вступ

Полімери та полімерні композиційні матеріали (ПКМ) на їх основі за останні 30 років отримали широке розповсюдження у всіх галузях науки і техніки [1; 2]. Завдяки унікальному поєднанню властивостей вони активно витісняють традиційні матеріали конструкційного призначення, такі як метали та їх сплави, деревину тощо. Особливу зацікавленість являють полімери спеціального призначення [3–6], які за рівнем властивостей наближаються до металів, однак у 3–5 разів легші за них, мають більш високий рівень зносостійкості та хімічної стійкості, здатні витримувати значущі навантаження та ін. Одними із таких полімерів є ароматичні поліаміди, міцність яких досягає 230 МПа, а тепло- та термостійкість 290 і 350°C відповідно.

До основних недоліків даних полімерів слід віднести їх високу собівартість. Для її зменшення ароматичні поліаміди наповнюють дешевими наповнювачами, які здатні покращувати рівень їх фізико-механічних, теплофізичних та трибологічних властивостей у порівнянні із вихідним полімером [7; 8]. Одним із таких наповнювачів є діоксид кремнію марки силікагель, який здатний до фізичної та хімічної взаємодії з макромолекулами ароматичного поліаміду при отриманні ПКМ та їх переробці у виробі

[9]. При цьому фізична взаємодія можлива за рахунок того, що наповнювач має добре розвинену поверхню (до 300 м<sup>2</sup>/г) із великою кількістю пор, які сприяють фізичній адсорбції матричного полімеру поверхнею наповнювача. Хімічна взаємодія силікагелю з ароматичним поліамідом можлива за рахунок утворення водневих зв'язків між реакційноздатними гидроксильними групами на поверхні наповнювача та молекулами матричного полімеру. У ряді робіт [10–13] описано ПКМ на основі поліолефінів, фторполімерів, фенопластів та силікагелю із підтвердженням їх фізичної або хімічної взаємодії, причому останню раніше визначали лише опосередковано, тобто відштовхуючись від зростання рівня фізико-механічних та теплофізичних властивостей композитів.

Тому актуальною задачею нашого дослідження став пошук теоретичних та експериментальних підтверджень хімічної природи взаємодії силікагелю із ароматичним поліамідом. Для її вирішення необхідно було детально вивчити особливості міжмолекулярних взаємодій, що виникають на рівні окремих ланок макромолекул із застосуванням широких можливостей квантово-хімічних розрахункових методів, а також коливальної спектроскопії.

### Експериментальна частина

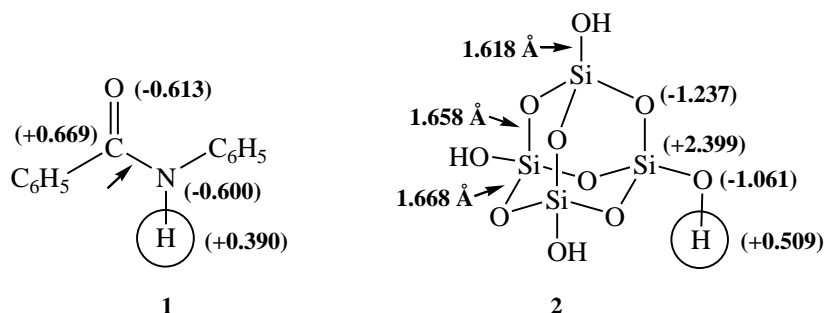
У якості полімерної матриці використовували ароматичний поліамід марки фенілон С1 (ТУ 6-05-221-101-71). У вихідному стані він являє собою дрібнодисперсний прес-порошок рожево-білого кольору з насипною щільністю 0.2–0.4 г/см<sup>3</sup> та розміром частинок 40–60 мкм. У якості наповнювача використовували силікагель, який отримували із висушеного, промитого та подрібненого гелю, що утворюється при підкисленні водно-лужного розчину натрій метасилікату. У вихідному стані він являє собою дрібнодисперсний прес-порошок білого кольору з насипною щільністю 0.3–0.6 г/см<sup>3</sup> та основним розміром частинок 5–10 мкм.

ІЧ спектри індивідуальних полімерів та композиційних матеріалів на їх основі було записано на приладі SPECTRUM ONE (PerkinElmer). Зразки для запису були приготовані за стандартною методикою із KBr [14]. Ефективний діаметр таблеток становив близько 12 мм із їх товщиною приблизно 1 мм. У цьому випадку був доцільним вміст полімерного порошку у кількості не більше 3 мас.%. Квантово-хімічні розрахунки на рівні *ab initio* теорії виконано із застосуванням пакету програм Gaussian 03, Revision E.01 із подальшою візуалізацією результатів у GaussView 3.0 [15]. Статистичну обробку даних здійснювали за допомогою програмного пакету ORIGIN Professional 6.0.

### Результати та їх обговорення

На початкових етапах дослідження принципового значення набуває питання вибору типових модельних сполук, які б забезпечували можливість адекватного

відтворення особливостей будови та міжмолекулярних взаємодій, що виникають у досліджуваних системах, й одночасно характеризувалися такими важливими рисами як простота та зручність з точки зору проведення квантово-хімічних розрахунків. У цьому випадку першочерговим завданням постає створення таких теоретичних моделей, які б ураховували наявність базових структурних фрагментів макромолекул та характеристичних взаємодій між ними без значної деталізації внутрішньої будови окремих складових супермолекулярних систем. Як свідчать проведені нами раніше дослідження будови полімерних композитів на основі арамідних в'язучих та наповнювачів [16; 17], структура *N*-фенілбензаміду (**1**) цілком відповідає складу мономерної ланки полімерів такого типу (схема 1). Що ж стосується наповнювача, яким у межах цієї роботи виступав силікагель, кращою модельною сполукою у найпростішому наближенні може слугувати структура складу H<sub>4</sub>[Si<sub>4</sub>O<sub>10</sub>] (**2**), що являє собою тетрациклічний каркас, побудований із атомів Силіцію та Оксигену, на поверхні якого зосереджено чотири ізольовані одна від одної еквівалентні групи –ОН. Беручи до уваги аморфний характер силікагелю, для якого характерними є прояви лише елементів локальної симетрії у певних фрагментах структури (кластерах), такий підхід до вибору модифікованої молекулярної моделі, на нашу думку, є виправданим. З іншого боку, кластерний метод є ефективним не лише при моделюванні локалізованих станів, але й численних поверхневих ефектів, які можуть мати принципове значення в умовах активних міжмолекулярних взаємодій [18].



Scheme 1. The structures of model compounds with some values of NBO atomic charges as well as bond lengths  
Схема 1. Структури модельних сполук із деякими значеннями NBO зарядів на атомах та довжинами зв'язків

Беручи до уваги усе вищезазначене, із застосуванням трипараметричного гібридного функціоналу густини у наближенні

B3LYP/6-311++G(d,p) нами було здійснено оптимізацію геометрії модельних сполук **1** та **2** у газовій фазі із одночасним розрахунком

відповідних наборів коливальних частот, згідно з якими локалізовані стаціонарні точки було охарактеризовано як мінімуми на поверхні потенційної енергії. Розподіл електронної густини із визначенням зарядів на атомах досліджуваних структур вивчали у рамках теорії натуральних зв'язуючих орбіталей (NBO) [19; 20].

Одержані дані викликають значну зацікавленість як з точки зору будови окремих ділянок – структурних фрагментів полімерної матриці фенілону, – так і їх взаємодії із силікагелем з можливим утворенням типових водневих зв'язків. Спираючись на це припущення, нами було запропоновано теоретичні моделі, що відтворюють безпосередню взаємодію молекул *N*-

фенілбензаміду (**1**) із тетрациклічною каркасною структурою складу  $H_4[Si_4O_{10}]$  (**2**). Розділення рівноважної геометрії димерів на окремі складові з їх подальшою оптимізацією у наближенні V3LYP/6-311++G(d,p) приводило до утворення «ізольованих» структур, які було одержано раніше. Розрахунок коливальних частот для всіх міжмолекулярних комплексів свідчив про відсутність уявних коливань, що дозволило охарактеризувати їх як мінімуми на поверхні потенційної енергії. При оцінюванні енергетичних параметрів локалізованих структур до уваги приймалися спеціальні поправки на похибку суперпозиції базисних наборів за процедурою Бойза-Бернарді [21]. Результати розрахунків представлено на рис. 1.

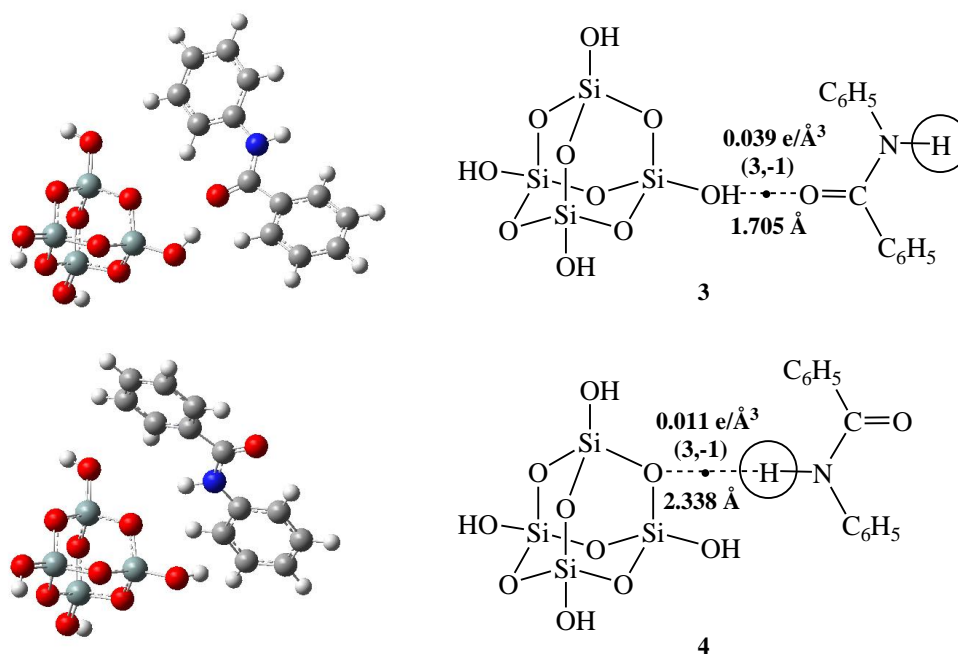


Fig. 1. The structures of molecular complexes in system «polyamide-silica gel» with some typical hydrogen bonds

Рис. 1. Структури молекулярних комплексів у системі «поліамід-силікагель» із деякими типовими водневими зв'язками

Слід відзначити, що найбільші внески у стабілізацію структур **3** та **4**, поряд зі слабкими взаємодіями електростатичного характеру, вносять міцні водневі зв'язки, утворені за участю місткової амідної групи та гідроксилу (~77%), а також атома Оксигену каркасного фрагменту (~23%), оцінені у межах АІМ теорії Бейдера [22]. При цьому розраховані енергії стабілізації становлять 32.4 та 12.5 кДж/моль відповідно. Значної уваги також було приділено визначенню загальних енергетичних ефектів гідратації нерелаксованих геометрій міжмолекулярних комплексів із застосуванням методу

поляризуючого континууму *PCM-V3LYP/6-311++G(d,p)//V3LYP/6-311++G(d,p)* ( $\epsilon=78.4$ ) без деталізації будови окремих сольватних оболонок. У цьому випадку різниця енергій для структур **3** та **4** становила не менше 12.0 кДж/моль на користь взаємодій першого типу. Для підтвердження вирішальної ролі ефектів водневого зв'язування у структурі ПКМ нами було здійснено детальний аналіз коливальних спектрів описаних раніше ізольованих (**1**, **2**) та димеризованих (**3**, **4**) форм з метою їх подальшого зіставлення між собою, а також із експериментальними даними. Останні теоретичні моделі цілком

адекватно відображають структурну ситуацію, за якої взаємодіючі молекули поряд зі зв'язаними водневим зв'язком групами (>C=O) та (>NH) містять також їх незв'язані аналоги. Як відомо, розраховані методами квантової хімії гармонічні коливальні частоти зазвичай є більшими за аналогічні параметри, одержані експериментальним шляхом. При цьому головним джерелом помилок, на думку авторів [23], є нехтування ефектами ангармонічності, а також відсутність повноти описання електронних кореляцій у зв'язку із

застосуванням обмежених наборів базисних функцій. Для підвищення точності розрахункових даних у їх відтворенні головних спектральних характеристик досліджуваних систем ми скористались допоміжними значеннями масштабуючих множників, які у випадку трипараметричного гібридного функціоналу B3LYP становили 0,9580 та 0,9688 для базисних наборів 6-311+G(d) та 6-311+G(d,p), відповідно [23]. Одержані результати представлено у таблиці, а також на рис. 2.

Table

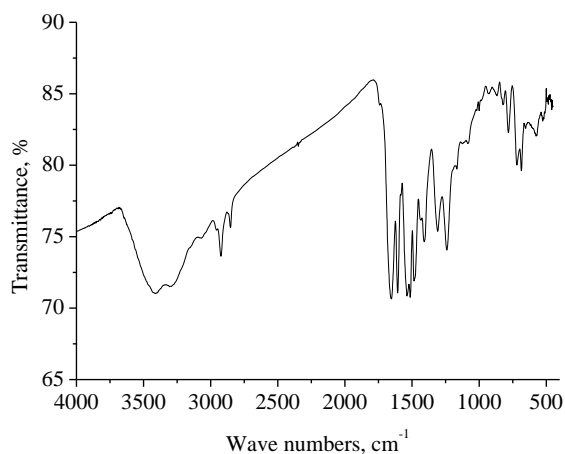
**Harmonic vibrational frequencies (cm<sup>-1</sup>) obtained experimentally as well as calculated at DFT-B3LYP/6-311++G(d,p) level of theory**

Таблиця

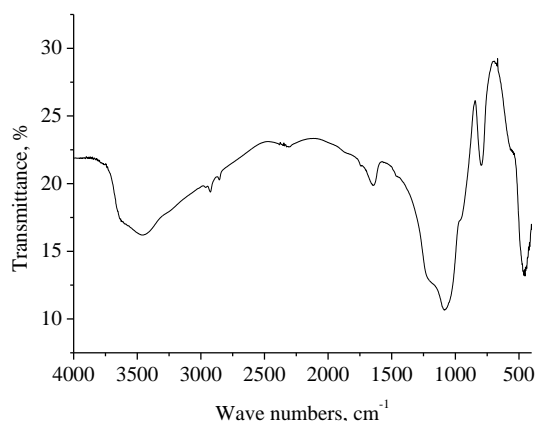
**Гармонічні коливальні частоти (см<sup>-1</sup>), одержані експериментальним шляхом, а також розраховані у наближенні DFT-B3LYP/6-311++G(d,p)**

Intensity, band shape <sup>a</sup>	C1 <sup>b</sup>	SG <sup>b</sup>	C1SG15 <sup>b</sup>	C1SG30 <sup>b</sup>	Model (3)	Model (4)	Interpretation <sup>c</sup>
w., wd.	3405	3460	3410	3419	3788	3790	$\nu_{(\text{OH})}$ of cage fragment or capacity of moisture
	3267	-	3345	3345	3507	3459	$\nu_{(\text{NH})}$ of amido groups
v. w.	2921	-	2925	3000	3092	3093	$\nu_{(\text{CH})}$ of benzene rings
	2851	-	2914	2897	3084	3086	(the same one)
s.	1649	-	1652	1655	1647	1673	$\nu_{(\text{CO})}$ of amido groups
v. s.	1605	-	1609	1611	1586	1588	$\nu_{(\text{CC})}$ of benzene rings with
	1526	-	1539	1539	1567	1568	$\delta_{(\text{NH})}$ of amido groups
	1474	-	1486	1486	1517	1520	(the same one)
s.	1412	-	1408	1412	1480	1479	$\delta_{(\text{CH})}$ of benzene rings
	1307	-	1319	1319	1423	1420	(the same one)
	1237	-	1250	1224	1305	1294	$\nu_{(\text{CN})}$ with $\delta_{(\text{CH})}$ of benzene rings
v. s., wd.	-	1087	1084	1091	1056	1024	$\nu_{(\text{SiO})}$ of cage fragment
w.	-	796	782	785	781	767	$\delta_{(\text{OH})}$ of cage fragment
	719	-	717	719	697	698	$\delta_{(\text{CH})}$ of benzene rings
	684	-	684	686	688	689	(the same one)
v. w.	570	-	568	571	586	624	$\delta_{(\text{NH})}$ of amido groups
s.	-	452	459	467	341	343	$\delta_{(\text{SiO})}$ of cage fragment

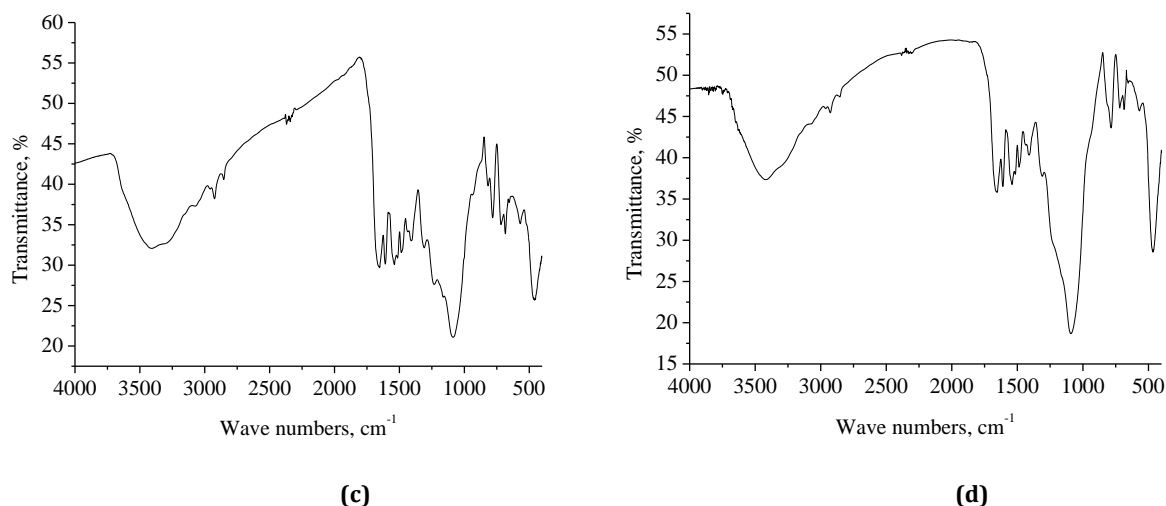
<sup>a</sup> s. – strong; w. – weak; wd. – wide; v. – very; <sup>b</sup> C1 – pure phenylon; SG – silica gel; C1SG15 and C1SG30 – composites with 15 and 30 wt% of silica gel; <sup>c</sup>  $\nu$  – stretching vibrations;  $\delta$  – bending vibrations



(a)



(b)



**Fig. 2. The IR absorption spectra of pure phenylon C1 (a), silica gel (b) as well as composites C1SG15 (c) and C1SG30 (d)**  
**Рис. 2. ІЧ спектри поглинання чистого фенілолу C1 (a), силікагелю (b), а також композитів C1SG15 (c) та C1SG30 (d)**

За літературними даними [24; 25], структурна ідентифікація аліфатичних поліамідів включає розгляд характеристичних смуг поглинання із надійним віднесенням сигналів у областях 3280, 2900, 1640, 1550 та 1545  $\text{cm}^{-1}$ . Аналіз одержаних нами результатів (таблиця) свідчить про присутність широких смуг при 3267 або 3345  $\text{cm}^{-1}$ , які відповідають валентним коливанням зв'язків (NH) амідних груп. В області  $\sim 1650 \text{ cm}^{-1}$  знаходиться інтенсивна смуга «Амід I», що є характерною для карбонілу зі значним внеском водневого зв'язування. Дійсно, у випадку розрахованих структур **3** та **4** спостерігається помітне зміщення цієї смуги поглинання з 1673  $\text{cm}^{-1}$  для «ізолюваної» групи ( $>\text{C}=\text{O}$ ) до 1647  $\text{cm}^{-1}$  у комплексі із водневим зв'язком. Аналогічне зміщення сигналу  $\nu_{(\text{NH})}$  відбувається з 3507 до 3459  $\text{cm}^{-1}$ . Зрештою, в області  $\sim 1530 \text{ cm}^{-1}$  спостерігається смуга «Амід II», що відповідає валентним коливанням карбон-карбонівих зв'язків арильних фрагментів за участю  $\delta_{(\text{NH})}$ . Характеристична смуга «Амід III» спостерігається поблизу 1237  $\text{cm}^{-1}$  та відповідає  $\nu_{(\text{CN})}$  за участю  $\delta_{(\text{CH})}$  бензенових кілець. З цієї точки зору принципового значення набуває також якісна ідентифікація сигналів силікагелю, що представлені широкою та інтенсивною смугою у області  $\sim 1090 \text{ cm}^{-1}$ , а також вузькими смугами поглинання меншої інтенсивності при 780 та 460  $\text{cm}^{-1}$ . Причому, у першому випадку переважають внески валентних коливань окремих зв'язків (Si-O), а у другому –  $\delta_{(\text{OH})}$  та  $\delta_{(\text{SiO})}$  в умовах ефективного водневого

зв'язування. Слід зауважити, що валентні коливання гідроксильних груп також можуть знаходити своє відображення на ділянці спектру 3405–3419  $\text{cm}^{-1}$ , яка зазвичай відповідає за присутність слідових кількостей води у досліджуваних зразках полімеру та композитів.

Наведені нижче усереднені набори хвильових чисел, одержані для усього ряду полімерних систем, добре корелюють між собою, що вказує на адекватне відтворення спектральних характеристик досліджуваних матеріалів у межах обраного розрахункового наближення:

$$\nu, \delta(\text{експ.}) = (99.16 \pm 25.17) + (0.90 \pm 0.01) \cdot \nu, \delta(\mathbf{3});$$

$$r = 0.998; S_0 = 54.98; n = 17, \quad (1.1)$$

$$\nu, \delta(\text{експ.}) = (94.02 \pm 27.85) + (0.91 \pm 0.01) \cdot \nu, \delta(\mathbf{4});$$

$$r = 0.998; S_0 = 60.66; n = 17. \quad (1.2)$$

Одержані результати цілком узгоджуються із проведеними раніше фізико-механічними та теплофізичними дослідженнями ПКМ на основі фенілолу із силікагелем [8]. Зокрема, такі показники як напруження при межі текучості, модуль пружності при стисканні та твердість збільшуються на 9–14% в залежності від вмісту наповнювача у порівнянні з вихідним полімером. При цьому лінійне температурне розширення зразків із вмістом силікагелю 15 та 30 мас.% становило не менше 354 та  $329 \cdot 10^{-7} \text{ 1/}^\circ\text{C}$  відповідно. Окремо слід відзначити суттєве зміщення значень тепло- та термостійкості отриманих ПКМ в область більш високих температур, що свідчить про значне покращення термостабільності та може слугувати

додатковим підтвердженням хімічної природи міжмолекулярних взаємодій окремих складових композитів.

### Висновки

Таким чином, наведені у роботі результати квантово-хімічних розрахункових досліджень свідчать про принципову можливість застосування методів і прийомів квантової хімії для вивчення особливостей внутрішньота міжмолекулярних взаємодій на рівні окремих ділянок – структурних фрагментів макромолекул. Результати розрахунків добре узгоджуються зі спектральними даними щодо будови досліджуваних полімерних матеріалів та можуть мати принципове значення з точки зору попередньої оцінки спорідненості окремих компонентів при створенні нових композиційних матеріалів на їх основі.

### Подяки

Автори висловлюють подяку Українсько-Американській лабораторії комп'ютерної хімії (ДНУ НТК «Інститут монокристалів» НАН України, м. Харків) за суттєву допомогу у здійсненні цієї роботи.

### Bibliography

- [1] Modern plastic solar cells: materials, mechanisms and modeling / R. C. Chiechi, R. W. A. Havenith, J. C. Hummelen [et al.] // Mater. Today. – 2013. – Vol. 16, N 7/8. – P. 281–289.
- [2] Shape memory polymers and their composites in biomedical applications / W. Zhao, L. Liu, F. Zhang [et al.] // Mater. Sci. Eng. C. – 2019. – Vol. 97. – P. 864–883.
- [3] Burya, A. I. Influence of metal-containing carbon fibers on the properties of carbon-filled plastics based on aromatic polyamide / A. I. Burya, A. M. Safonova, I. V. Rula // J. Eng. Phys. Thermophys. – 2012. – Vol. 85, N 4. – P. 943–949.
- [4] Трибологические характеристики органопластиков на основе фенилона / А. И. Буря, О. А. Набережная, В. И. Теренин, А.-М. В. Томина // Проблемы тертя та зношування. – 2015. – N 3(68). – С. 51–55.
- [5] Каллистер У. Д. Материаловедение: от технологии к применению (металлы, керамика, полимеры) / У. Д. Каллистер, Д. Дж. Ретвич. – СПб. : Научные основы и технологии, 2011. – 896 с.
- [6] Михайлин Ю. А. Термоустойчивые полимеры и полимерные материалы / Ю. А. Михайлин. – СПб. : Профессия, 2006. – 624 с.
- [7] Kabat O. Antifrictional Polymer Composites Based on Aromatic Polyamide and Carbon Black / O. Kabat, V. Sytar, K. Sukhyu // Chem. Chem. Technol. – 2018. – Vol. 12, N 3. – P. 326–330.
- [8] Кабат О. С. Термостойкие полимерные композиты специального назначения для тяжело нагруженных узлов трения / О. С. Кабат, В. И. Сытар, А. А. Митрохин // Технологические системы. – 2017. – N 79/2. – С. 25–33.
- [9] Fillers on the silica base for polymer composites for constructional purposes / O. S. Kabat, K. V. Heti, I. L.

- Kovalenko, A. M. Dudka // J. Chem. Technol. – 2019. – Vol. 27, N 2. – P. 247–254.
- [10] Полимерные композиционные материалы на основе фторопласта и метод их получения / О. С. Кабат, Б. Г. Харченко, А. Д. Деркач [и др.] // Вопр. химии и хим. технологии. – 2019. – N 3. – С. 116–122.
- [11] Polymer composite materials with a high level of thermal stability based on phenolic resins and disperse silica fillers / O. S. Kabat, Yu. M. Kobelchuk, D. O. Chervakov, O. V. Chervakov // Science, Technologies, Innovations. – 2018. – N 2(6). – P. 48–53.
- [12] Efficient grafting of polypropylene onto silica nanoparticles and the properties of PP/PP-g-SiO<sub>2</sub> nanocomposites / W. Yuan, F. Wang, Z. Chen [et al.] // Polym. J. – 2018. – Vol. 151. – P. 242–249.
- [13] Конструкционные фенопласты с высоким уровнем термической стабильности / О. С. Кабат, О. В. Черваков, Ю. М. Кобельчук [и др.] // Технологические системы. – 2017. – N 79/2. – С. 33–39.
- [14] Thompson J. M. Infrared Spectroscopy / J. M. Thompson. – Pan Stanford : Jenny Stanford Publishing, 2018. – 211 p.
- [15] Бутырская, Е. В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView / Е. В. Бутырская. – М. : СОЛОН-ПРЕСС, 2011. – 224 с.
- [16] 1Tokar A. The Quantum-Chemical Modelling of Structure and Spectral Characteristics for Molecular Complexes in Pentaplast-Terlon System / A. Tokar, E. Synchuk, O. Chigvintseva // Chem. Chem. Technol. – 2017. – Vol. 11, N 4. – P. 405–409.
- [17] Токар А. В. Эффекты водородного связывания в структурном анализе фенилона С-2: квантово-химическая интерпретация / А. В. Токар, О. П. Чигвинцева // Вісн. Дніпропетр. ун-ту. Сер. Хімія. – 2017. – Т. 25, вип. 1. – С. 9–14.
- [18] Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела / В. Г. Цирельсон. – М. : Лаборатория знаний, 2017. – 522 с.
- [19] Weinhold F. Discovering Chemistry With Natural Bond Orbitals / F. Weinhold, C. R. Landis. – New Jersey : John Wiley & Sons, 2012. – P. 132–133.
- [20] Weinhold F. Natural bond orbital analysis: A critical overview of relationships to alternative bonding perspectives / F. Weinhold // J. Comput. Chem. – 2012. – Vol. 33, N 30. – P. 2363–2379.
- [21] Sordo J. A. On the use of the Boys-Bernardi function counterpoise procedure to correct barrier heights for basis set superposition error / J. A. Sordo // J. Mol. Struct. – 2001. – Vol. 537, N 1–3. – P. 245–251.
- [22] Koldaivel P. Study of proper and improper hydrogen bonding using Bader's atoms in molecules (AIM) theory and NBO analysis / P. Koldaivel, V. Nirmala // J. Mol. Struct. – 2004. – Vol. 694, N 1–3. – P. 33–38.
- [23] Merrick J. P. An Evaluation of Harmonic Vibrational Frequency Scale Factors / J. P. Merrick, D. Moran, L. Radom // J. Phys. Chem. A. – 2007. – Vol. 111, N 45. – P. 11683–11700.
- [24] Mechanocomposites on the basis of polyamide / I. A. Vorsina, T. F. Grigoreva, S. V. Vosmerikov, N. Z. Lyakhov // Nauka i Studia. – 2015. – Vol. 5, N 136. – P. 20–25.
- [25] Лирова Б. И. Анализ полимерных композиционных материалов / Б. И. Лирова, Е. В. Русинова. – Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2008. – 187 с.

### References

- [1] Chiechi, R. C., Havenith, R. W. A., Hummelen, J. C., Koster, L. J. A., & Loi, M. A. (2013). Modern plastic solar cells:

- materials, mechanisms and modeling. *Mater. Today*, 16(7/8), 281–289. doi: [10.1016/j.mattod.2013.07.003](https://doi.org/10.1016/j.mattod.2013.07.003)
- [2] Zhao, W., Liu, L., Zhang, F., Leng, J., & Liu, Y. (2019). Shape memory polymers and their composites in biomedical applications. *Mater. Sci. Eng. C*, 97, 864–883. doi: [10.1016/j.msec.2018.12.054](https://doi.org/10.1016/j.msec.2018.12.054)
- [3] Burya, A. I., Safonova, A. M., & Rula, I. V. (2012). Influence of metal-containing carbon fibers on the properties of carbon-filled plastics based on aromatic polyamide. *J. Eng. Phys. Thermophys.*, 85(4), 943–949. doi: [10.1007/s10891-012-0734-6](https://doi.org/10.1007/s10891-012-0734-6)
- [4] Burya, O. I., Naberezhnaya, O. A., Terenin, V. I., & Tomina, A.-M. V. (2015). [Tribological characteristics of organic plastics based on phenylene]. *Problems of friction and wear*, 3(68), 51–55 (in Russian).
- [5] Kallister, U. D., & Retvich, D. J. (2011). [*Materials science: from technology to application (metals, ceramics, polymers)*]. St. Petersburg, Russian Federation: Scientific foundations and technologies (in Russian).
- [6] Mikhaylin, Yu. A. (2006). [*Heat-resistant polymers and polymeric materials*]. St. Petersburg, Russian Federation: Profession (in Russian).
- [7] Kabat, O., Sytar, V., & Sukhyy, K. (2018). Antifrictional Polymer Composites Based on Aromatic Polyamide and Carbon Black. *Chem. Chem. Technol.*, 12(3), 326–330. doi: [10.23939/chcht12.03.326](https://doi.org/10.23939/chcht12.03.326)
- [8] Kabat, O. S., Sytar, V. I., & Mitrokhin, A. A. (2017). [Heat-resistant polymeric compositional materials of a special purpose for highloading friction units]. *Technological systems*, (79/2), 25–33 (in Russian).
- [9] Kabat, O. S., Heti, K. V., Kovalenko, I. L., & Dudka, A. M. (2019). Fillers on the silica base for polymer composites for constructional purposes. *J. Chem. Technol.*, 27(2), 247–254. doi: [10.15421/081925](https://doi.org/10.15421/081925)
- [10] Kabat, O. S., Kharchenko, B. G., Derkach, O. D., Artemchuk, V. V., & Babenko, V. G. (2019). [Polymer composites based on fluoroplastic and method for the production thereof]. *Voprosy khimii i khimicheskoi tehnologii – Issues of Chemistry and Chemical Technology*, (3), 116–122 (in Russian). doi: [10.32434/0321-4095-2019-124-3-116-122](https://doi.org/10.32434/0321-4095-2019-124-3-116-122)
- [11] Kabat, O. S., Kobelchuk, Yu. M., Chervakov, D. O., & Chervakov, O. V. (2018). Polymer composite materials with a high level of thermal stability based on phenolic resins and disperse silica fillers. *Science, Technologies, Innovations*, 2(6), 48–53.
- [12] Yuan, W., Wang, F., Chen, Z., Gao, Ch., Liu, P., Ding, Y., Zhang, Sh., & Yang, M. (2018). Efficient grafting of polypropylene onto silica nanoparticles and the properties of PP/PP-g-SiO<sub>2</sub> nanocomposites. *Polym. J.*, 151, 242–249. doi: [10.1016/j.polymer.2018.07.060](https://doi.org/10.1016/j.polymer.2018.07.060)
- [13] Kabat, O. S., Chervakov, O. V., Kobelchuk, Y. M., Adrianova, M. V., & Suvorova, Y. A. (2017). [Constructional phenoplasts with high level of thermal stability]. *Technological systems*, (79/2), 33–39 (in Russian).
- [14] Thompson, J. M. (2018). *Infrared Spectroscopy*. Stanford, USA: Jenny Stanford Publishing.
- [15] Butyrskaya, E. V. (2011). [*Computational chemistry: bases of theory and work with the programs of Gaussian and GaussView*]. Moscow, Russian Federation: SOLON-PRESS (in Russian).
- [16] Tokar, A., Synchuk, E., & Chigvintseva, O. (2017). The Quantum-Chemical Modelling of Structure and Spectral Characteristics for Molecular Complexes in Pentaplast-Terlon System. *Chem. Chem. Technol.*, 11(4), 405–409. doi: [10.23939/chcht11.04.405](https://doi.org/10.23939/chcht11.04.405)
- [17] Tokar, A. V., & Chigvintseva, O. P. (2017). [The hydrogen bonding effects in structural analysis of phenilon C-2: the quantum-chemical interpretation]. *Bull. Dnipropetr. Univ. Ser. Chem.*, 25(1), 9–14 (in Russian). doi: [10.15421/081702](https://doi.org/10.15421/081702)
- [18] Tsirelson, V. G. (2017). [*The quantum chemistry. Molecules, molecular systems and solids*]. Moscow, Russian Federation: Laboratory of Knowledge (in Russian).
- [19] Weinhold, F., & Landis, C. R. (2012). *Discovering Chemistry With Natural Bond Orbitals*. New Jersey, USA: John Wiley & Sons.
- [20] Weinhold, F. (2012). Natural bond orbital analysis: A critical overview of relationships to alternative bonding perspectives. *J. Comput. Chem.*, 33(30), 2363–2379. doi: [10.1002/jcc.23060](https://doi.org/10.1002/jcc.23060)
- [21] Sordo, J. A. (2001). On the use of the Boys-Bernardi function counterpoise procedure to correct barrier heights for basis set superposition error. *J. Mol. Struct.*, 537(1–3), 245–251. doi: [10.1016/S0166-1280\(00\)00681-3](https://doi.org/10.1016/S0166-1280(00)00681-3)
- [22] Kolandaivel, P., & Nirmala, V. (2004). Study of proper and improper hydrogen bonding using Bader's atoms in molecules (AIM) theory and NBO analysis. *J. Mol. Struct.*, 694(1–3), 33–38. doi: [10.1016/j.molstruc.2004.01.030](https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2004.01.030)
- [23] Merrick, J. P., Moran, D., & Radom, L. (2007). An Evaluation of Harmonic Vibrational Frequency Scale Factors. *J. Phys. Chem. A*, 111(45), 11683–11700. doi: [10.1021/jp073974n](https://doi.org/10.1021/jp073974n)
- [24] Vorsina, I. A., Grigoreva, T. F., Vosmerikov, S. V., & Lyakhov, N. Z. (2015). Mechanocomposites on the basis of polyamide. *Nauka i Studia*, 5(136), 20–25.
- [25] Lirova, B. I., & Rusinova, E. V. (2008). [*Analysis of polymer composite materials*]. Yekaterinburg, Russian Federation: Ural University Publishing (in Russian).